

令和 4 年 6 月 3 日現在

機関番号：11301

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06465

研究課題名（和文）物質分離・輸送を最適化する多層・多孔質材料の離散曲面論

研究課題名（英文）Discrete surface theory for optimal mass transportation in porous materials

研究代表者

小谷 元子（Kotani, Motoko）

東北大学・材料科学高等研究所・教授

研究者番号：50230024

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 40,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、原子・分子が作るミクロな構造とその物質材料が持つマクロな性質や機能との関係を記述・解析できる「離散幾何解析」という数学の枠組みを発展させ、材料科学者と連携して、構造から機能を予測したり（順問題）、求める機能を発現する構造を予測したり（逆問題）する取り組みを進めた。これにより、原子・分子の世界での「曲面」に関する数学の知見が、炭素のナノ材料をはじめとする具体系の構造や機能の予測と理解に役立つことを示し、次世代物質探索のための新しいアプローチを提示できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、データと人工知能（AI）を用いた物質材料の探索が盛んになっているが、ミクロな構造とマクロな性質との関係を調べ、求める性質を実現するための構造を予測する逆問題を解くことは簡単ではない。数学を用いて複雑な構造が持つ本質的な情報をデータ化し、ミクロとマクロの関係を階層横断的に理解して逆問題を解くための道すじを示せたことが、本研究成果の社会的意義である。また、具体例を考察することで「特異点を排除するのではなく、むしろ活用する工夫をする」などの発想の転換が数学の側に誘起されたことが学術的意義の例として挙げられる。

研究成果の概要（英文）："Discrete geometric analysis" is a mathematical framework, which enables us to describe and analyze the correlation between microscopic structures and macroscopic properties of various materials. In this project, both of the "forward problems" predicting materials properties from their structure and the "inverse problems" suggesting reasonable structures from desired properties are approached by developing such a framework cooperating with materials scientists. It was shown that mathematical findings on "curved surface" in the world of atoms and molecules work also for predicting and understanding the structures and properties of real materials such as nano carbon. A novel approach for design of the next generation materials was successfully proposed.

研究分野：数学、微分幾何学、離散幾何解析学

キーワード：微分幾何学 離散幾何学 極小曲面

1. 研究開始当初の背景

広い内表面を持つ多孔体は触媒や吸着剤、分離膜などへの応用が検討され実用が進んでいる。従来の多孔体では反応物と生成物が共存下で拡散輸送されるが、分離機構がなく生成物が滞留することで後続の反応を阻害するため、化学反応の速度は低下する。反応・生成物などの「物質分離・輸送を制御・最適化する多層・多孔質構造」を設計できれば、低温低圧のもとでの合成が可能となり夢の触媒技術となる。従来から触媒物質を多孔体によって実現することは実施されているが、構造形成は経験に基づく試行錯誤によるものであり、狙った構造を設計するというよりは偶発的に優れた機能をもつ構造を見出すアプローチが主であった。ナノレベルで構造を観測・評価し、制御できる技術が進む中、より精密な設計が期待される。

研究代表者はこれまで、内藤(名古屋大学)らとともに、離散曲面論の構築を行ってきた。曲面論の離散化は自明ではなく、21世紀に入っていくつかの提案が異なる立場でなされている。研究代表者の立場は、「最小エネルギー原理」を念頭に、トポロジカルなネットワークを最も対称的に実現する「標準的实现」を用い、実際の物質内の原子構造やナノ構造への適用を可能にしようとするものである。すでに、カーボンネットワークの分類に関しては、力学特性(有機化学者との共同研究)や電子特性(計算科学者との共同研究)について、現象と相関のよい数理モデルを与えることが確認されている。

2. 研究の目的

本計画は新学術領域研究「次世代物質探索のための離散幾何学」における計画研究 A03「極小曲面とナノ構造の動的構造形成」の一部をなすものとして、「3次元トポロジー的手法」と極小曲面論などの「微分幾何学的手法」により多孔質構造の分類と形成のための数理モデルを構築し、革新的な触媒物質を創成することを目指す。

「反応・生成物分離輸送を制御・最適化する多層・多孔質構造」を設計する上での指針となるのは、多重連続場の双対として現れるネットワーク分類(3次元トポロジー手法)と、それを実際の物質として実現するためのネットワークに対応する特異点付き極小曲面の動的構造形成(微分幾何学的手法)である。これらは数学の観点からも新しい課題を含んでおり、本計画の遂行により、離散幾何解析の分野に本質的な進展をもたらす

3. 研究の方法

相分離による革新的触媒の生成につながる知見の獲得を目指し、離散幾何解析学を専門とする研究代表者の指揮のもとで以下の2点に取り組む。

- (1) 多層・多孔質材料の最適構造を3次元トポロジー手法とネットワーク解析を用いて行う
- (2) 最適構造を相分離によって実現するためのナノ構造の動的形成の数理モデルを構築する

本研究では(1)の実現のために、要素分解にとどまらずこれを組み立ててできる3次元ネットワークのうち拡散を最適化するものを分類する。特に物質分離輸送を可能にする多重・多層構造を実現するために、多重ネットワークを分類できる3次元トポロジーの最先端知識を適用する。また、スペクトル理論の観点から、分類されたネットワークが実際に物質として実現されたときの物性を調べる。これらを踏まえて作成した数理モデルに基づくシミュレーションを行い、最適構造を特定する。

さらに、(2)の実現のために、(1)で特定したネットワークを、「指定された特異点を許容する周期的極小曲面」として構成することを考える。三重連続構造に対応する三分岐極小曲面による実現の研究を行う。極小曲面の局所的分岐構造はプラトールの公式により決定されており、この局所分岐構造のネットワーク分類理論が A. Taylor などにより完結されている。Meeks-Yau (Ann. Math.) の研究を適用し、特に、シミュレーションで得られた三分岐極小曲面の理論的な裏付けを行う。研究代表者がこれまで行ってきた、標準的实现を用いた離散幾何解析学、離散微分幾何学が有用な道具立てとなる。

得られる成果を踏まえて新学術領域研究内の他の計画研究「A03-2(ナノ極小曲面の相分離過程の大域解析)」「A03-3(界面活性剤を用いた多連続多孔質構造の形成)」と連携し、有効かつ実現可能な数理モデルを構築して、革新的触媒のための最適多層・多孔質構造とその動的構造形成を行う。これにより、領域全体の課題である「次世代物質・材料科学のための離散幾何解析」の雛形となる成功例を与える。

4. 研究成果

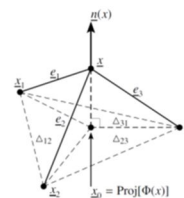
(1) 基盤となる理論(離散曲面論、離散極小曲面論)の完成

代表者らは、(a)与えられたネットワークを「離散曲面」とみなして幾何学的に計算するアルゴリズムの開

発、(b)ネットワークの細分とその収束列として背後に隠れた連続構造の特定、(c)収束の極限に現れる特異点の分類に対する道筋を与えた。

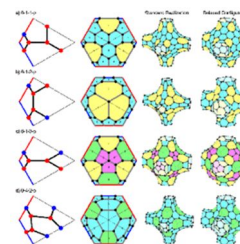
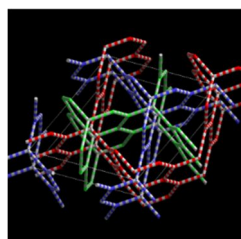
Definition 3.1. An embedding $\Phi: X \rightarrow \mathbb{R}^3$ of a graph $X = (V, E)$ is said to be a discrete surface if

- (i) $X = (V, E)$ is a 3-valent graph, that is a graph of degree 3,
- (ii) for each $x \in V$, at least two vectors in $\{\Phi(e) \mid e \in E_x\}$ are linearly independent as vectors in \mathbb{R}^3 ,
- (iii) locally oriented, that is, the order of the three edges is assumed to be assigned to each vertex of X .



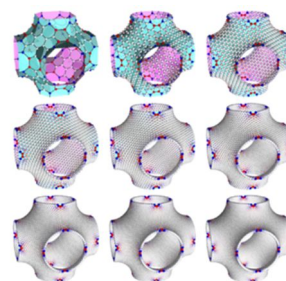
$$\mathcal{A}[\Phi + \underline{m}] = \sum_{x \in V} \{1 - 2tH(x) + t^2K(x)\} A(x),$$

これにより、要素分解と再構築を経て得られる 3 次元ネットワークのうち拡散を最適化するものを分類し、「(A)多層・多孔質材料の最適構造を 3 次元トポロジー手法とネットワーク解析を用いて行う」目標に近づいた。また、得られた「離散極小曲面論」を踏まえて「(B)最適構造を相分離によって実現するためのナノ構造の動的形成の数理モデルを微分幾何学的手法で構築」の鍵となる(数理的な)具体例を構成する方策を調査したところ、「サークル・パッキングを用いたネットワークの共形構造(Thurston)」を活用した離散極小曲面の Weierstrass 表現が、最近 Pinkall-Lam により発表されていることを発見した。これを我々の理論と組み合わせ、(A)で特定したネットワークを「指定された特異点を許容する周期的極小曲面」として構成すれば良いことが分かった。



物質分離輸送のための 3 重ネットワークと 3 次元ネットワークの分類

これにより三重連続構造に対応する三分岐極小曲面による実現の研究を行う基盤が整い、新学術領域研究内の A03-2、A03-3 と連携した具体的な系のシミュレーションや動的構造形成の解析につながった。



細分列の収束と特異点の発生

(2) Goldberg-Coxeter(GC)細分における固有値の評価

GC 細分は巨大な分子構造の数学的な記述方法として注目されている数学概念である。分担者の橋らは正則グラフの GC 細分とグラフ・ラプラシアン固有値問題について、元々のグラフの固有値により GC 細分の固有値を上から具体的に評価できること、GC 細分列の固有値は任意の実数を近似すること、GC 細分列全てにおいて巨大な重複度を持つ固有値が必ず存在することなどを証明した。また、ランダムウォークの量子版とされる「量子ウォーク」の研究を進め、小松堯氏(横浜国大)と共に高次元におけるグローバル型量子ウォークの局在性を明らかにした。これにより、上記(A)(B)の研究を量子系に拡張するための理論的な足がかりを与えた。

(3) 離散曲面の細分化に伴う収束性の保証

協力者の鈴木は、「調和的な埋め込みによってユークリッド空間上に離散曲面を実現し、細分をとって(連続)曲面へ収束させるときに、離散曲面上のランダムウォークが連続曲面上の確率過程に収束するかどうか」という問題に取り組んだ。極限の曲面が離散的であるような場合には、一般的なクラスの離散曲面で収束が得られた。これにより、安定性や拡散速度を表す数理モデルの構築と解析、化学工学的な最適構造の提案に際して、結果の振る舞い方を保証できるようになった。

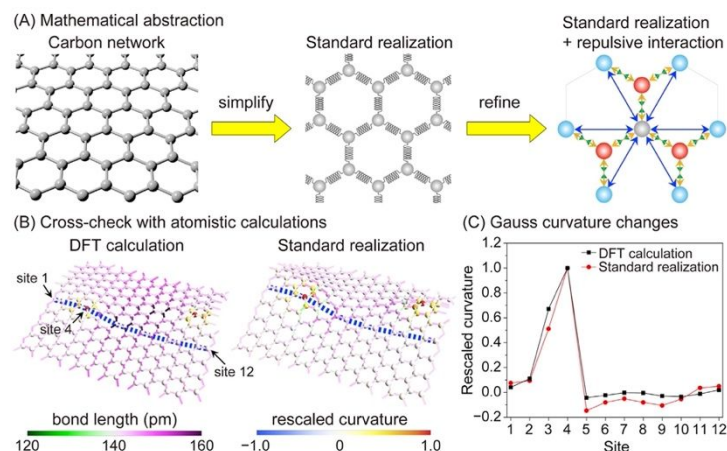
(4) グラフに基づく多孔質構造の分類と最適化

協力者の小澤らは、グラフの辺に重みのついた有向グラフに対して無向グラフ上の Lin-Lu-Yau 型リッチ曲率を拡張し、幾何解析的な性質について研究を行なった。またグラフのラプラシアン固有値とリッチ曲率からグラフの大まかな形が決定されることを示した。これはリーマン多様体における Chung の最大直径定理のグラフ版であり、離散曲面論的な立場とは違った観点から多連続多孔質構造の分

類・最適化への応用が期待できる成果である。

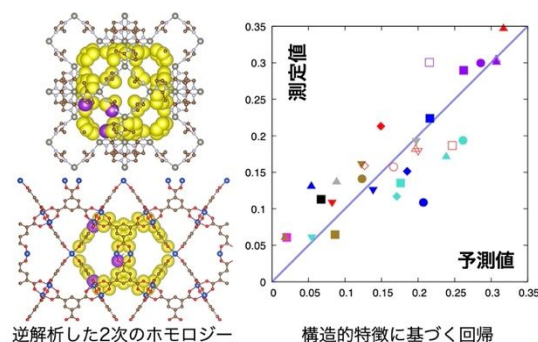
(5) 離散曲面を持つナノ構造物質の SRR1 モデルによるスクリーニング手法の提案

「研究開始当初の背景」で触れた「標準実現」を炭素のナノ構造の予測に応用すべく、斥力項を入れた SRR1 モデルを構築し、高速な構造予測によって共役な離散曲面系での第一原理分子動力学計算を代替しつつ、ガウス曲率と窒素ドープエネルギーの相関を捉えることができた。これは、求められる触媒機能に対して異元素のドープ箇所を制御し、離散曲面をデザインする「逆推論」の手法として期待され、「第一原理計算(DFT)と比較して約10億倍高速な計算手法」と新聞でも報道された(科学新聞、2021年7月16日)。



(6) 位相的数据解析による MOF (金属有機構造体) の特性予測

パーシステントホモロジーを活用した位相的数据解析を用いることで、原子配置を表す離散点データに含まれる「穴」の特徴(大きさや形)を定量化し、ミクロな構造情報とマクロな物性との相関を調べることができる。新学術領域研究の A03 計画研究(小谷・内藤・赤木)と公募研究(吉川)でチームを作り、位相的数据解析で抽出された構造的特徴から MOF(金属有機構造体)の CO₂ 吸着性能の実測値を予測する課題に取り組んだところ、シンプルでありながら満足すべき予測精度と直観的な理解を与えるモデルを構築できた。本研究期間は終了したが、これを用いて大規模な MOF データベースに対するスクリーニングを行い、吸着能の高い MOF を作成する実証に歩を進めている。



近年、データと人工知能(AI)を用いた物質材料の探索が盛んになっているが、ミクロな構造とマクロな性質との関係を調べ、求める性質を実現するための構造を予測する逆問題を解くことは簡単ではない。数学を用いて複雑な構造を持つ本質的な情報をデータ化し、ミクロとマクロの関係を階層横断的に理解して逆問題を解くための道すじを示せたことは国内外を見ても先進的な成果であり、様々な形で素材産業への展開が期待される点で社会的なインパクトを与える。

また、「収束において生じる特異点をどのように記述できるか、特に『座標』や『連続構造』がない離散曲面においてどのように定式化するか」は大きな課題であった。当初は、細分列の構成によって特異点を排除できると考えて工夫を繰り返したが、具体例を考察する中で特異点を積極的に受け入れ、それを分類・制御することでより豊かな研究になると発想を転換し、実現できたことは、学術的なインパクトである。

当初目標として掲げた「触媒」の実現はまだ途上であるが、数学が提案する構造がこれまで「絵にかいた餅」的なイメージを持たれがちであったことを考えると、理論的基盤を着実に構築し、具体系に応用できることを示せた点で、本研究はブレークスルーをもたらすことができたとと言える。

< 対応する成果 >

M.Kotani, H.Naito, T.Ohmori, "Discrete Surface Theory", CAGD 58 (2017).

M.Kotani, H.Naito, C.Tao, "Construction of continuum from a discrete surface by its iterated subdivisions, Tohoku Mathematical Journal, (2022) [10.48550/arXiv.1806.03531].

X. Luo, T. Tate, "Up and down Grover walks on simplicial complexes", Linear Algebra and Its Applications 545 (2018) 174-206.

T. Komatsu, T. Tate, "Eigenvalues of Quantum Walks of Grover and Fourier Types", *J. Fourier Anal. Appl.* (2018).

K. Suzuki. "Convergence of non-symmetric diffusion processes on RCD spaces", *Calc. Var. Partial. Dif.* 57:120(5), (2018).

R. Ozawa, Y. Sakurai, T. Yamada, "Maximal diameter theorem for directed graphs of positive Ricci curvature", *Communications in Analysis and Geometry*, (2022) [10.48550/arXiv.2011.00755].

A. Dechant, T. Ohto, Y. Ito, M.V. Makarova, Y. Kawabe, T. Agari, H. Kumai, Y. Takahashi, H. Naito, M. Kotani, "Geometric model of 3D curved graphene with chemical dopants", *Carbon* 182 (2021) 223-232.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計23件（うち査読付論文 22件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 M. Kotani, H. Naito, C. Tao	4. 巻 74
2. 論文標題 Construction of continuum from a discrete surface by its iterated subdivisions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Tohoku Mathematical Journal	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.48550/arXiv.1806.03531	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kazutoshi Inoue, Ji-Young Roh, Kazuaki Kawahara, Mitsuhiro Saito, Motoko Kotani, Yuichi Ikuhara	4. 巻 212
2. 論文標題 Arrangement of polyhedral units for [0001]-symmetrical tilt grain boundaries in zinc oxide	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 116864 ~ 116864
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.116864	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 A. Dechant, T. Ohto, Y. Ito, M.V. Makarova, Y. Kawabe, T. Agari, H. Kumai, Y. Takahashi, H. Naito, M. Kotani	4. 巻 182
2. 論文標題 Geometric model of 3D curved graphene with chemical dopants	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 223 ~ 232
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2021.06.004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 R. Ozawa, Y. Sakurai, T. Yamada	4. 巻 -
2. 論文標題 Maximal diameter theorem for directed graphs of positive Ricci curvature	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Communications in Analysis and Geometry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.48550/arXiv.2011.00755	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Aokage, E. Shinkawa and H.-F. Yamada	4. 巻 17
2. 論文標題 Virasoro action on the Q-functions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Symmetry Integrability and Geometry: Methods and Applications (SIGMA)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3842/SIGMA.2021.089	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hidetoshi Masai	4. 巻 28
2. 論文標題 On continuity of drifts of the mapping class group	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Math. Res. Lett.	6. 最初と最後の頁 823 ~ 847
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 L. Dello Schiavo, K. Suzuki	4. 巻 281
2. 論文標題 Rademacher-type theorems and Sobolev-to-Lipschitz properties for strongly local Dirichlet spaces	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Funct. Anal.	6. 最初と最後の頁 109234 ~ 109234
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jfa.2021.109234	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 L. Dello Schiavo, K. Suzuki	4. 巻 18
2. 論文標題 Sobolev-to-Lipschitz property on QCD-spaces and applications	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Math. Ann.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00208-021-02331-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Suzuki Kohei	4. 巻 -
2. 論文標題 Regularity and Stability of Invariant Measures for Diffusion Processes under Synthetic Lower Ricci Curvature Bounds	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Ann. Sc. Norm. Super	6. 最初と最後の頁 44 ~ 44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2422/2036-2145.201911_001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 R. Ozawa, Y. Sakurai, T. Yamada,	4. 巻 -
2. 論文標題 Heat flow and concentration of measure on directed graphs with a lower Ricci curvature bound	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Potential Analysis	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11118-022-09994-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazutoshi Inoue, Kazuaki Kawahara, Mitsuhiro Saito, Motoko Kotani, Yuichi Ikuhara	4. 巻 202
2. 論文標題 3D arrangement of atomic polyhedra in tilt grain boundaries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 266 ~ 276
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2020.10.017	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 R. Ozawa, Y. Sakurai, T. Yamada	4. 巻 59
2. 論文標題 Geometric and spectral properties of directed graphs under a lower Ricci curvature bound	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Calculus of Variations and Partial Differential Equations	6. 最初と最後の頁 142
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00526-020-01809-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tatsuya Tate	4. 巻 22
2. 論文標題 Eigenvalues, absolute continuity and localizations for periodic unitary transition operators	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top	6. 最初と最後の頁 1950011 ~ 1950011
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S0219025719500115	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Omori Toshiaki, Naito Hisashi, Tate Tatsuya	4. 巻 26
2. 論文標題 Eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter Constructions for 3- and 4-valent Graphs	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Electronic Journal of Combinatorics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.37236/8481	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Morita Hiroshi, Miyamoto Ayano, Kotani Motoko	4. 巻 188
2. 論文標題 Recoverably and destructively deformed domain structures in elongation process of thermoplastic elastomer analyzed by graph theory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Polymer	6. 最初と最後の頁 122098 ~ 122098
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.polymer.2019.122098	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ikemoto Koki, Yang Seungmin, Naito Hisashi, Kotani Motoko, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 11
2. 論文標題 A nitrogen-doped nanotube molecule with atom vacancy defects	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-15662-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Kohei	4. 巻 57
2. 論文標題 Convergence of non-symmetric diffusion processes on RCD spaces	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Calculus of Variations and Partial Differential Equations	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00526-018-1398-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 X. Luo, T. Tate	4. 巻 545
2. 論文標題 Up and down Grover walks on simplicial complexes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Linear Algebra and Its Applications	6. 最初と最後の頁 174 ~ 206
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.laa.2018.01.036	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Komatsu Takashi, Tate Tatsuya	4. 巻 25
2. 論文標題 Eigenvalues of Quantum Walks of Grover and Fourier Types	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Fourier Analysis and Applications	6. 最初と最後の頁 1293 ~ 1318
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00041-018-9630-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toda Masatoshi, Kajimoto Shinji, Toyouchi Shuichi, Kawakatsu Toshihiro, Akama Yohji, Kotani Motoko, Fukumura Hiroshi	4. 巻 88
2. 論文標題 Phase Separation Dynamics of a Binary Fluid with a Closed-Loop Phase Diagram	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 024007 ~ 024007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/jpsj.88.024007	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Toyouchi, S. Kajimoto, M. Toda, H. Fukumura, T. Kawakatsu, Y. Akama, M. Kotani	4. 巻 122
2. 論文標題 Time-Resolved Structured Illumination Microscopy for Phase Separation Dynamics of Water and 2-Butoxyethanol Mixtures: Interpretation of "Early Stage" Involving Micelle-Like Structures	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. B	6. 最初と最後の頁 12375 ~ 12385
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b10244	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 井上和俊、斎藤光浩、小谷元子、幾原雄一	4. 巻 56
2. 論文標題 整数論的手法による粒界原子構造予測	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 あたりあ	6. 最初と最後の頁 589 ~ 596
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/materia.55.582	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Motoko Kotani, Hisashi Naito, Toshiaki Omori	4. 巻 58
2. 論文標題 A discrete surface theory	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Computer Aided Geometric Design	6. 最初と最後の頁 24 ~ 54
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cagd.2017.09.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計65件 (うち招待講演 43件 / うち国際学会 29件)

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 DX社会の基盤技術～数理を活用した産学連携について
3. 学会等名 数理活用産学連携イニシアティブ (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 離散幾何解析とその応用
3. 学会等名 2021年度 日本数学会 秋季総合分科会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 離散幾何解析と物質科学への応用
3. 学会等名 The World of Mathematical Physics II (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Mathematics, a Common Language of Science in History and in the Digital Era
3. 学会等名 Breaking barriers for gender equity through research (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T.Tate
2. 発表標題 Spectral properties of magnetic Laplacian on a catenoid
3. 学会等名 International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新川恵理子
2. 発表標題 変分法・対称性を用いた幾何学的特徴づけ
3. 学会等名 マス・フォア・イノベーションカフェ（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新川恵理子
2. 発表標題 Geometry of anisotropic double crystals
3. 学会等名 日本応用数理学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新川恵理子
2. 発表標題 変分原理に基づく離散曲面の幾何
3. 学会等名 サマースクール離散微分幾何チュートリアル2021（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Eriko Shinkawa
2. 発表標題 Geometry of anisotropic double crystals
3. 学会等名 The 5th Symposium for The Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics, and the 4th Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Eriko Shinkawa
2. 発表標題 Symmetry and stability of anisotropic double crystals
3. 学会等名 RIMS Review Seminar Symmetry and Stability in Differential Geometry of Surfaces (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 Quotients of the curve complex
3. 学会等名 Geometry of discrete groups and hyperbolic spaces (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 タイヒミュラー空間のホロ境界
3. 学会等名 トポロジーシンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小澤龍ノ介
2. 発表標題 Lin--Lu--Yau型リッチ曲率が下に有界な有向グラフの幾何解析について
3. 学会等名 日本数学会2021年度秋季総合分科会幾何学分科会特別講演 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 デジタル時代の化学 数学連携
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 ソフトマテリアルのネットワーク構造
3. 学会等名 第15回TPE技術研究会公開講演会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 デジタル時代の数学・材料科学連携
3. 学会等名 東京大学・日本電子産学連携室設立15周年記念 次世代電子顕微鏡法社会連携講座設立記念シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 材料探索のための離散幾何解析学
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次会（2021）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小澤龍ノ介
2. 発表標題 球面の測度集中現象と集中位相
3. 学会等名 Real, Complex and Functional Analysis Seminar 2020 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小澤龍ノ介
2. 発表標題 リッチ曲率が下に有界な有向グラフの幾何解析的性質
3. 学会等名 多様体上の微分方程式 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小澤龍ノ介
2. 発表標題 リッチ曲率が下に有界な有向グラフの幾何解析的性質
3. 学会等名 第67回幾何学シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 On systoles and ortho spectrum rigidity
3. 学会等名 阪大トポロジーセミナー (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 Continuity of the drift of mapping class group
3. 学会等名 Geometric Group Theory in East Asia(GGTEA) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 Quotients of curve complex
3. 学会等名 京都大学微分トポロジーセミナー (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 Complete exceptional surgeries on two-bridge links
3. 学会等名 The 16th East Asian Conference on Geometric Topology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 曲線複体の商空間
3. 学会等名 2020年度「リーマン面・不連続群論」研究集会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 3次元多様体の(非)双曲性の計算機による判定
3. 学会等名 数学ソフトウェアとフリードキュメント 32(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Suzuki
2. 発表標題 Configuration Spaces over Singular Spaces
3. 学会等名 研究集会「確率解析とその周辺」
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Motoko KOTANI
2. 発表標題 Discrete geometric analysis for materials research
3. 学会等名 ICCM 2019(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Non commutative geometry for Topological Phase
3. 学会等名 In and around Topological Physics(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 On the Continuity of Drifts of Mapping Class Groups
3. 学会等名 Geometric Topology Fair 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 MATHEMATICAL CHALLENGES FOR MATERIALS DESIGN BASED ON DISCRETE GEOMETRIC ANALYSIS
3. 学会等名 2019 KWMS International Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kohei Suzuki
2. 発表標題 Configuration Spaces over Metric Measure Spaces
3. 学会等名 Japanese-German Open Conference on Stochastic Analysis 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 赤木和人
2. 発表標題 数理的手法による顕微画像データからの記述子生成
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Mathematical challenges for materials design
3. 学会等名 Frontiers in Mathematical Science Research Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 On systoles and ortho spectrum rigidity
3. 学会等名 Seminar on Geometry (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 On rigidity of length-related spectra
3. 学会等名 The 6th Tokyo Tech - Uppsala University Joint Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kohei Suzuki
2. 発表標題 Configuration Spaces Over Metric Measure Spaces
3. 学会等名 Heat Kernels, Stochastic Processes and Functional Inequalities (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuto Akagi
2. 発表標題 Topological Data Analysis of Amorphous Carbon at High-Temperature
3. 学会等名 MRM 2019, Symposium B-3: Mathematical Materials Science (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Toshiaki Omori, Hisashi Naito, Tatsuya Tate
2. 発表標題 Eigenvalues of the Laplacian on the Goldberg-Coxeter constructions for 3- and 4-valent graphs
3. 学会等名 MRM 2019, Symposium B-3: Mathematical Materials Science (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 次世代材料探索のための数学－材料科学連携
3. 学会等名 SIP シンポジウム2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小谷先生
2. 発表標題 Non Commutative Geometry and Topological Phase
3. 学会等名 Indo Japan Joint Workshop on Quantum Computation & Information (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 数学でマイクロとマクロをつなぐ
3. 学会等名 第8回世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)サイエンスシンポジウム 数学の驚くべき力 数学が繋ぐ多様な世界(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小澤龍ノ介
2. 発表標題 測度距離空間列の射影極限とピラミッド
3. 学会等名 リーマン幾何と幾何解析(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hidetoshi Masai
2. 発表標題 On systoles and ortho spectrum rigidity
3. 学会等名 NUS Topology and Geometry Seminar(国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小澤龍ノ介
2. 発表標題 リッチ曲率が下に有界な有向グラフの幾何解析的性質
3. 学会等名 日本数学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小谷 元子
2. 発表標題 離散幾何学による物質探索への挑戦
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kohei Suzuki
2. 発表標題 Convergence of Diffusion Processes on Metric Measure Spaces Under Lower Ricci Curvature Bound
3. 学会等名 The 40th Conference on Stochastic Processes and their Applications - SPA 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kohei Suzuki
2. 発表標題 Stability of Invariant Measures Under Synthetic Lower Ricci Curvature Bounds
3. 学会等名 9th International conference on Stochastic Analysis and Its Applications (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 A mathematical challenge to a new phase of materials science
3. 学会等名 SSDM 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小谷 元子
2. 発表標題 数学と諸分野・産業との連携への挑戦
3. 学会等名 2018 年度日本機械学会年次大会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 正井 秀俊
2. 発表標題 Topological entropy of random walks on the mapping class group
3. 学会等名 2018 Seoul-Tokyo Conference - Geometry and Topology - (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Mathematical challenge to understand Materials structure
3. 学会等名 2018 Taiwan Mathematical Society Annual Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Materials research in the digitalized society
3. 学会等名 World Premier Research in Japan Symposium
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuto Akagi
2. 発表標題 Topological data analysis and materials characterization
3. 学会等名 The 2nd Symposium for World Leading Research Centers (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tatsuya Tate
2. 発表標題 Quantum walks defined by periodic unitary transition operators
3. 学会等名 GEOQUANT 2017 conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Mathematical Challenge to Understanding of Material
3. 学会等名 International Conference on Research and Education in Mathematics 2017 (ICREM8) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 楯 辰哉
2. 発表標題 単体複体から派生するグローバーク
3. 学会等名 第 5 回 Yokohama Workshop on Quantum Walks (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小谷元子
2. 発表標題 数学から材料科学へのアプローチ
3. 学会等名 シンポジウム「高分子未来サミット」(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Mathematical challenge for materials science
3. 学会等名 2017 Dasan Conference, Mathematical Challenges and Industrial Problem Solving (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Motoko Kotani
2. 発表標題 Mathematical challenges for materials design
3. 学会等名 Total Energy and Force Methods 2018 Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 赤木和人
2. 発表標題 パーシステントホモロジーを用いた物質構造解析
3. 学会等名 顕微ナノ材料科学研究会 / 日本表面科学会 合同シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>【プレスリリース】</p> <ul style="list-style-type: none">・(A03-1・A03-2・公募A03・総括班) 『数学を取り入れたシミュレーションで材料設計を加速 - グラフェン触媒設計に従来法よりも10億倍速い計算時間で成功 - 』東北大学, 2021年07月07日 https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/achievements/press/2021/20210707_001417.html
<p>【アウトリーチ】</p> <ul style="list-style-type: none">・鈴木康平 京都大学理学部 理学部専門基礎科目「理学と社会交流 II」で、外部講師として講演 2020年12月・正井秀俊 東京工業大学理学院 × すうがくぶんか 2021年9月12日
<p>【受賞】</p> <ul style="list-style-type: none">・正井秀俊: 令和元年度東工大教育賞, 2021年4月7日
<p>【新聞掲載】</p> <ul style="list-style-type: none">・(A03-1・A03-2・公募A03・総括班) 「東北大・阪大・筑波大・金沢大・名大、グラフェン触媒設計に従来法よりも10億倍速い計算時間で成功」日本経済新聞電子版, 2021年7月7日・(A03-1・A03-2・公募A03・総括班) 「数学と物質科学が融合 シミュレーションで材料設計加速 東北大など有用性実証」科学新聞 (WEB), 2021年7月16日
<p>【その他】</p> <ul style="list-style-type: none">・ISSN: 2365-6336, Editor-in-chief: M. Kotani, (Series Editors: Y. Nishiura, M. Tsukada, Allen M. Samuel, Jaeger W., Luckhaus S.), Springer, SpringerBriefs in the Mathematics of Materials

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	楯 辰哉 (Tate Tatsuya) (00317299)	東北大学・理学研究科・教授 (11301)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	赤木 和人 (Akagi Kazuto)		
研究協力者	鈴木 康平 (Suzuki Kohei)		
研究協力者	正井 秀俊 (Masai Hidetoshi)		

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	小澤 龍ノ介 (Ozawa Ryunosuke)		
研究協力者	新川 恵理子 (Shinkawa Eriko)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計4件

国際研究集会 Workshop "Discrete Geometric Analysis and its Applications"	開催年 2022年～2022年
国際研究集会 MRM2019, Symposium B-3, Mathematical Materials Science -Mathematical Approaches for Materials Designs in the Data Driven Society-	開催年 2019年～2019年
国際研究集会 Workshop on "Random Matrices and Related Topics"	開催年 2019年～2019年
国際研究集会 AIMR Workshop on Pure and Applied Mathematics	開催年 2019年～2019年

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
	ドイツ	ボン大学	ベルリン自由大学
英国	ケンブリッジ大学		
オーストラリア	シドニー大学		
米国	UCサンタバーバラ大学		